

Erzeugung eines annähernd dreieckförmigen
Oszillationsverlaufs mittels eines chemischen
Reaktionssystems mit Massenwirkungskinetik

MOLEKULARE ALGORITHMEN SS2019

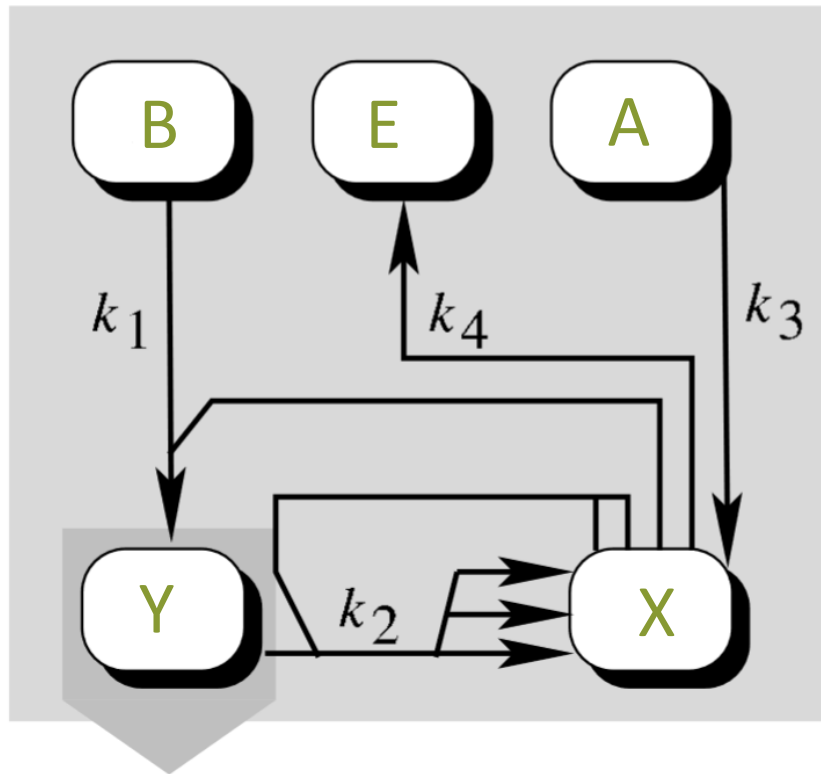
MANUEL REICHENBACHER

IRINA VIDIS

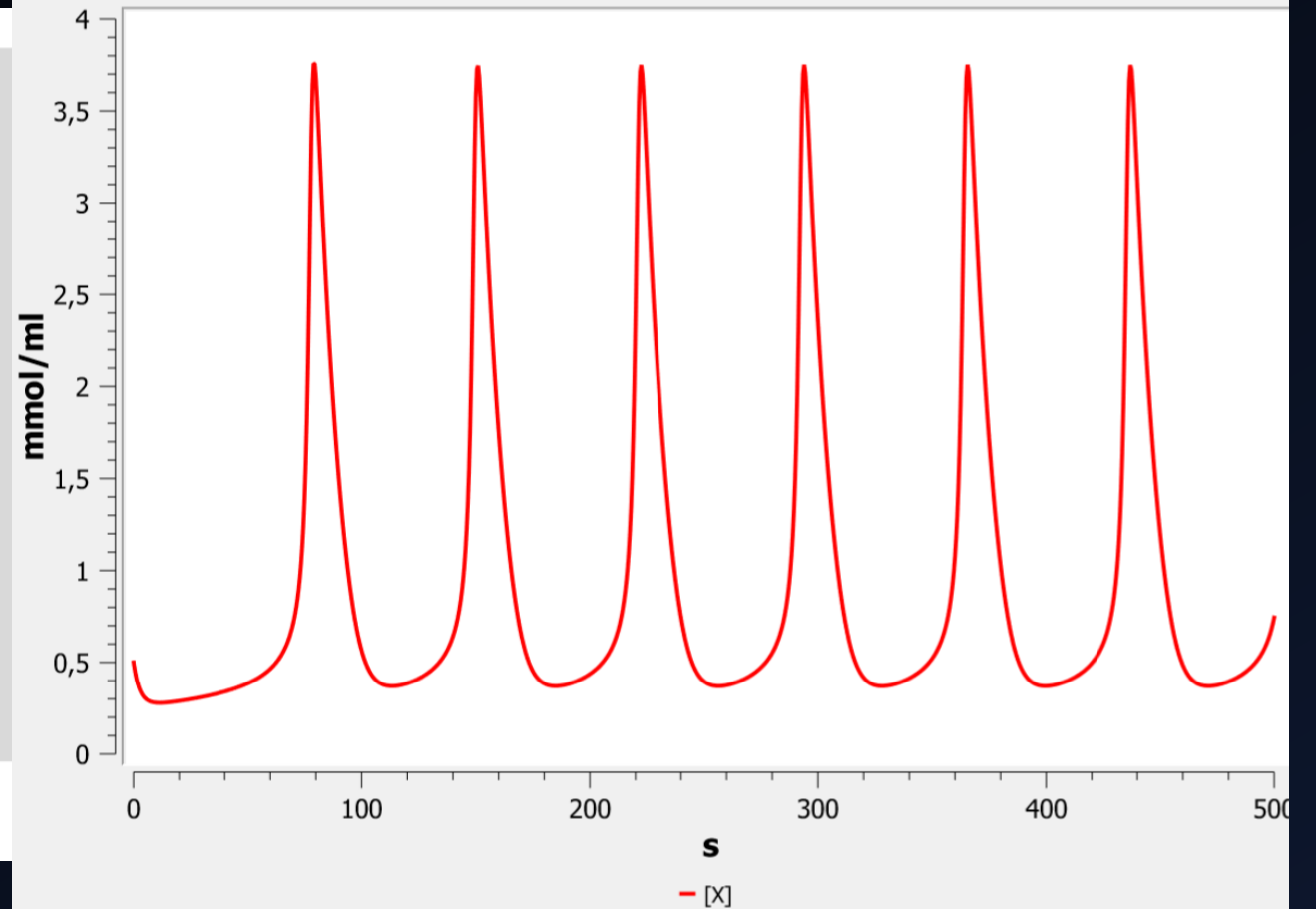
Aufgabenstellung: Dreieckförmiger Oszillationsverlauf

- Brusselator mit X als Ausgabespezies nehmen und eine geeignete Korrekturfunktion, die aus arithmetischen Komponentenzusammengesetzt ist, multiplikativ oder additiv nachschalten
- Modellierung und Simulation des Gesamtsystems und die Durchführung
- Wie lässt sich der Anstiegswinkel α des Dreiecksverlaufs einstellen?

Brusselator

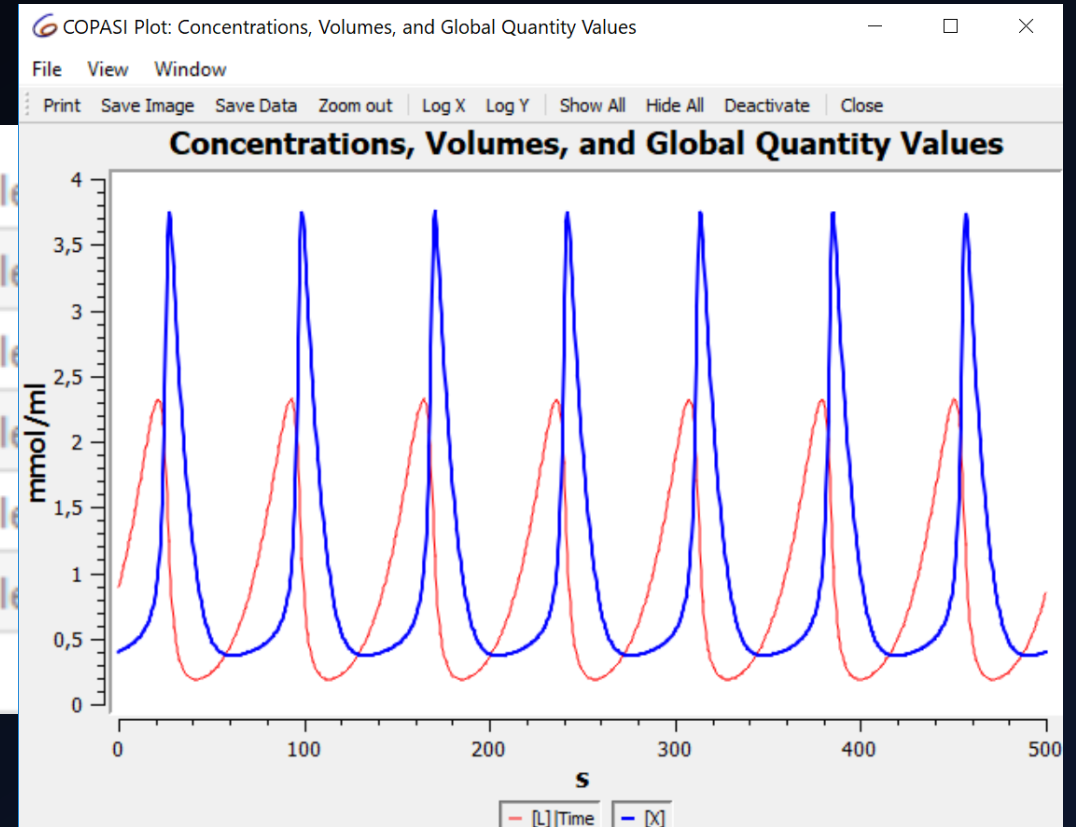


Concentrations, Volumes, and Global Quantity Values



Idee: Oszillierende Spezies X als Trigger für Zerfall

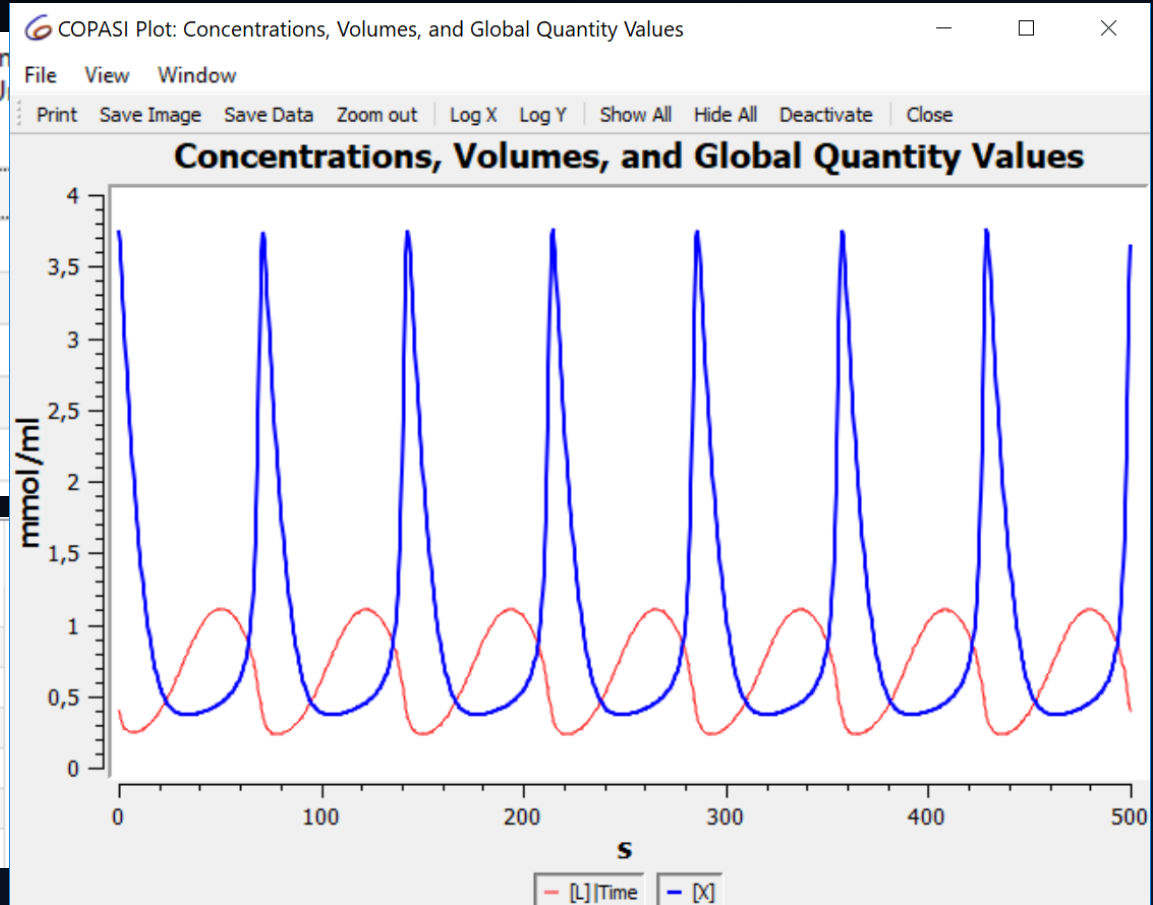
1	R1	$A \rightarrow X$	Mass action (irreversible)
2	R2	$2 * X + Y \rightarrow 3 * X$	Mass action (irreversible)
3	R3	$X + B \rightarrow Y$	Mass action (irreversible)
4	R4	$X \rightarrow E$	Mass action (irreversible)
5	reaction	$L \rightarrow 2 * L$	Mass action (irreversible)
6	reaction_1	$L + X \rightarrow X$	Mass action (irreversible)
	New Reaction		



Idee: Signal muss breiter werden, Aufbau und Zerfall balancieren

#	Name	Compartment	Type	Unit	Initial Con [U]
1	X	compartment	reactions	mmol/ml	3
2	Y	compartment	reactions	mmol/ml	1
3	A	compartment	fixed	mmol/ml	1
4	B	compartment	fixed	mmol/ml	3
5	E	compartment	fixed	mmol/ml	0
6	L	compartment	reactions	mmol/ml	1
	New Species	compartment	reactions	mmol/ml	1

#	Name	Reaction	Rate Law	Flux [mmol/s]	Noise Expression
1	R1	A -> X	Mass action (irreversible)	0,1	
2	R2	2 * X + Y -> 3 * X	Mass action (irreversible)	1,71495	
3	R3	X + B -> Y	Mass action (irreversible)	1,09139	
4	R4	X -> E	Mass action (irreversible)	0,363795	
5	reaction	L -> 2 * L	Mass action (irreversible)	0,0402507	
6	reaction_1	2 * L + X -> X	Mass action (irreversible)	0,0589391	
	New Reaction				

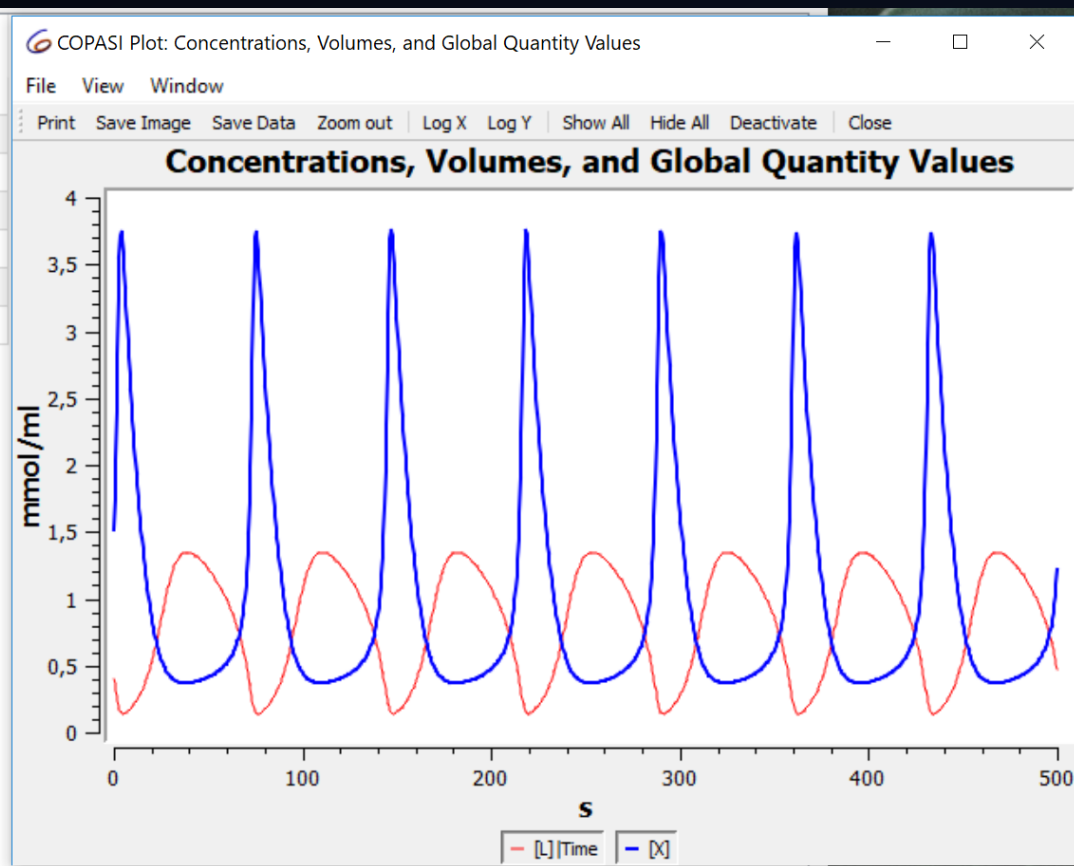


$$k_1 = \dots = k_6 = 0,1$$

Erster Versuch Kanten zu glätten

#	Name	Reaction	Rate Law	Flux [mmol/s]	Noise Expression
1	R1	A -> X	Mass action (irreversible)	0,1	
2	R2	2 * X + Y -> 3 * X	Mass action (irreversible)	0,62643	
3	R3	X + B -> Y	Mass action (irreversible)	0,364543	
4	R4	X -> E	Mass action (irreversible)	0,121514	
5	reaction	L -> 2 * L	Mass action (irreversible)	0,477898	
6	reaction_1	2 * L + X -> X	Mass action (irreversible)	0,277523	
	New Reaction				

#	Name	Compartment	Type	Unit	Initial Concentration [Unit]	Concentration [Unit]	Rate [Unit/s]	Initial Exp [Ur]
1	X	compartment	reactions	mmol/ml	1,21514	1,21514	0,240373	
2	Y	compartment	reactions	mmol/ml	4,24246	4,24246	-0,261887	
3	A	compartment	fixed	mmol/ml	1	1	0	
4	B	compartment	fixed	mmol/ml	3	3	0	
5	E	compartment	fixed	mmol/ml	0	0	0	
6	L	compartment	reactions	mmol/ml	0,477898	0,477898	-0,0771472	
	New Species	compartment	reactions	mmol/ml	1			

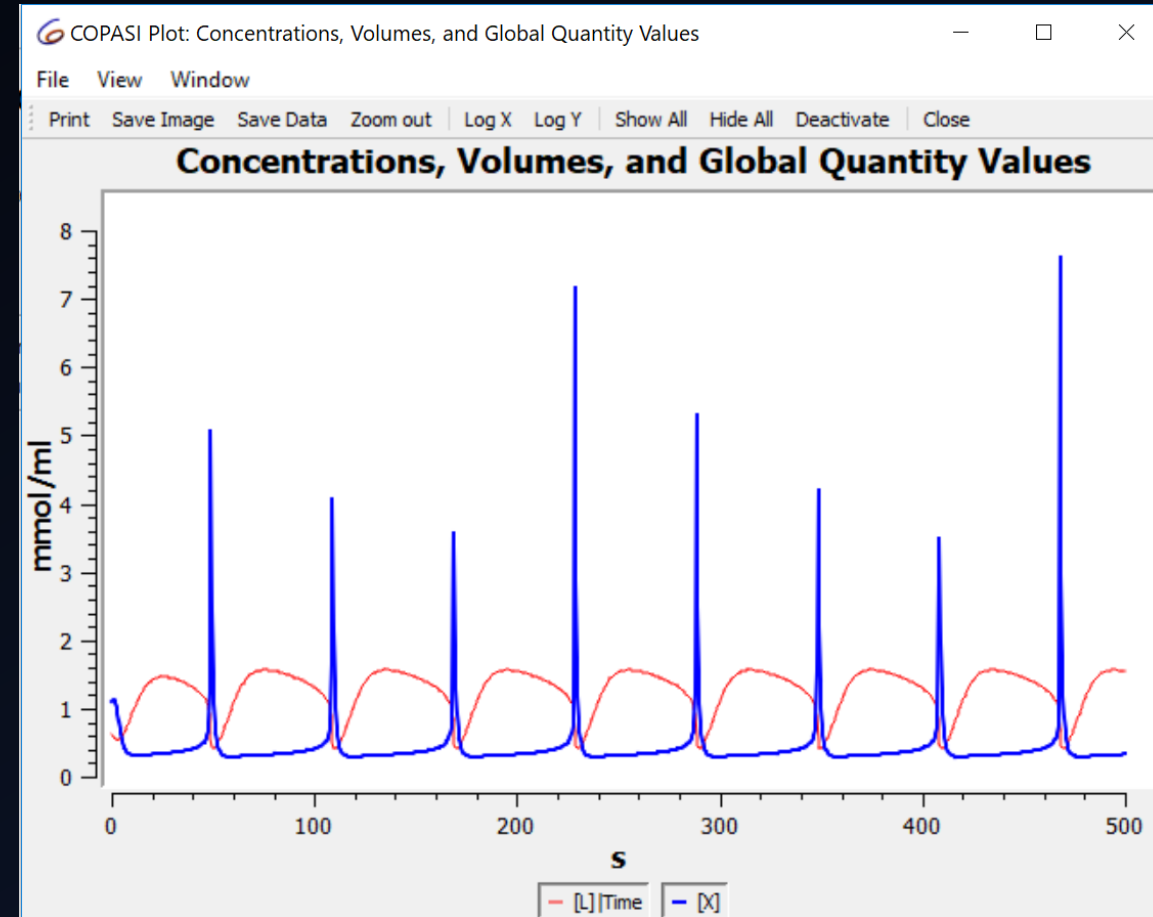


K für Brusselator: 0,1. Für nachgeschaltete Reaktion : 0,2.

Idee: schärfere Peaks vom Brusselator wären bessere Trigger, dann wären die Kanten von L gerader

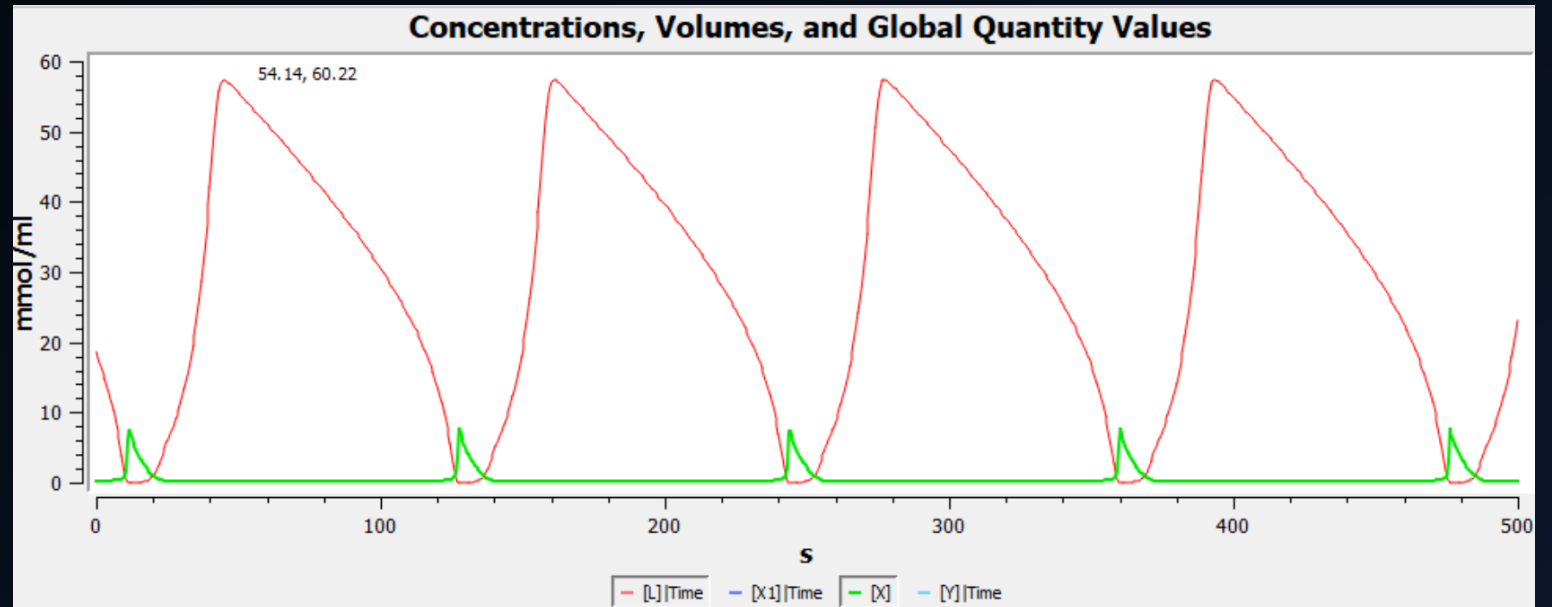
- Hier ist k von der Reaktion

$A \rightarrow 2X = 0,1$, dabei sind die anderen Konstanten 0,2.

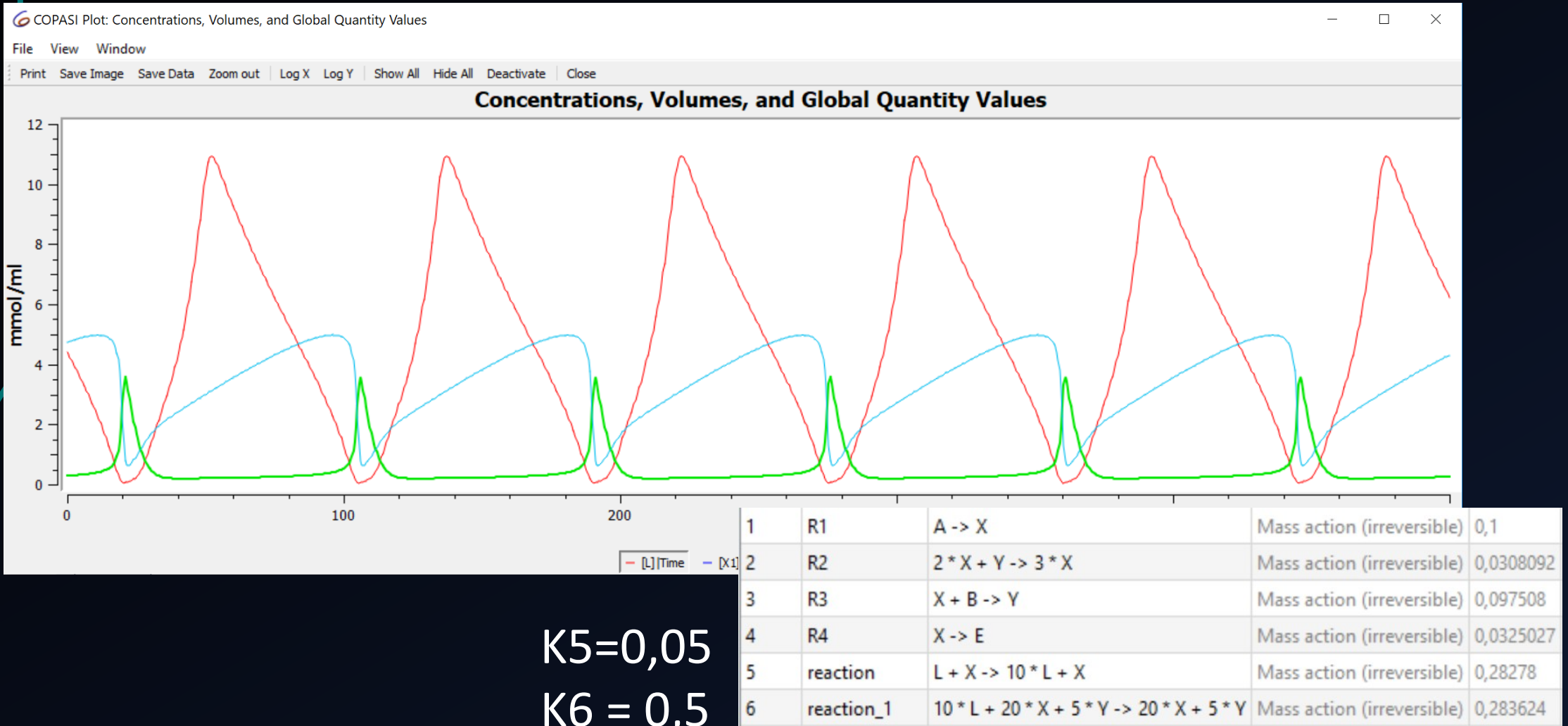


Idee: beide Kanten müssen steiler werden.
Beschleunigung der beiden Reaktionen

1	R1	$A \rightarrow X$	Mass action (irreversible)	0,1
2	R2	$2 * X + Y \rightarrow 3 * X$	Mass action (irreversible)	0,0135734
3	R3	$X + B \rightarrow Y$	Mass action (irreversible)	0,0848802
4	R4	$X \rightarrow E$	Mass action (irreversible)	0,0282934
5	reaction	$L + X \rightarrow 10 * L + X$	Mass action (irreversible)	0,325602
6	reaction_1	$10 * L + 20 * X \rightarrow 20 * X$	Mass action (irreversible)	4,29956e-05



Idee: Kopplung nicht nur an Konzentration X, sondern auch Y beim Zerfall, damit die rechte Flanke steiler wird



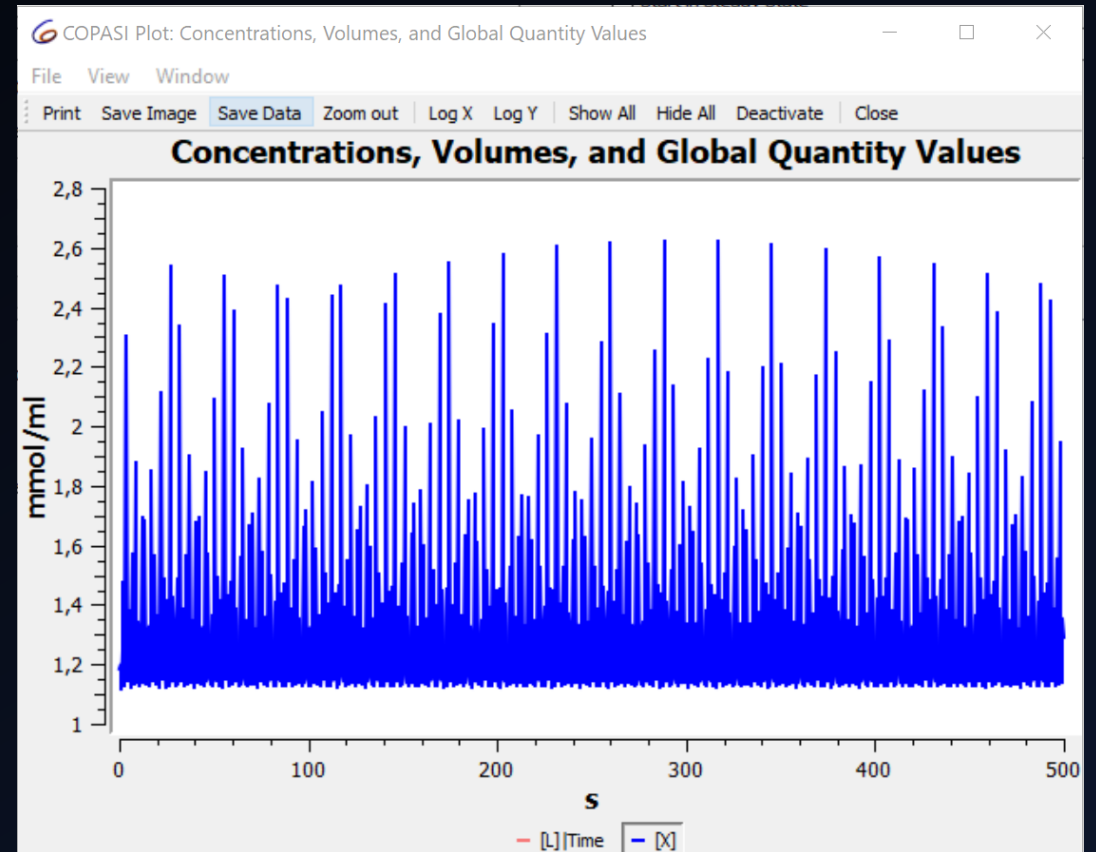
$K5=0,05$

$K6 = 0,5$

For Fun: reiner Zufall beim Experimentieren 😊

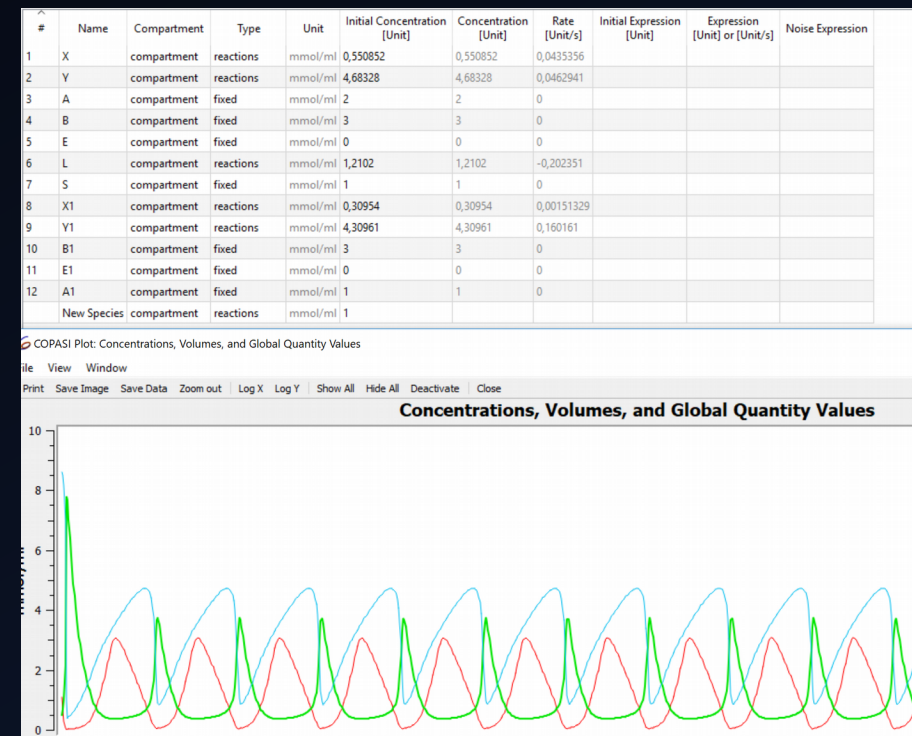
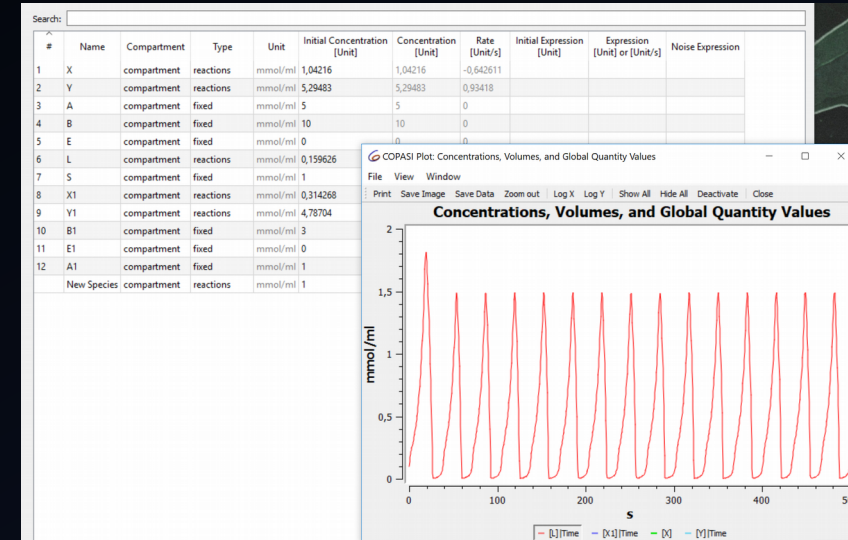
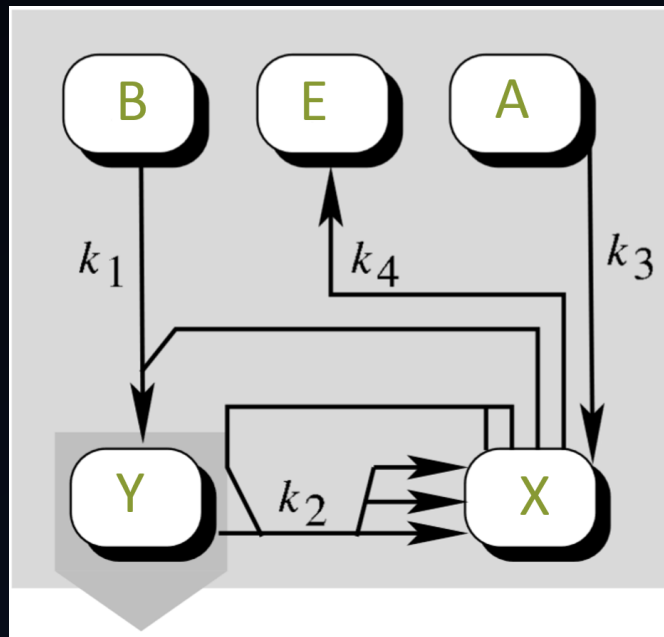
#	Name	Reaction	Rate Law	Flux [mmol/s]	Noise Expression
1	R1	$A \rightarrow 12 * X$	Mass action (irreversible)	0,1	
2	R2	$6 * X + Y \rightarrow 8 * X$	Mass action (irreversible)	0,3667	
3	R3	$X + B \rightarrow 2 * Y$	Mass action (irreversible)	0,772787	
4	R4	$4 * X \rightarrow E$	Mass action (irreversible)	0,550382	
5	reaction	$L \rightarrow 2 * L$	Mass action (irreversible)	0,0371666	
6	reaction_1	$2 * L + X \rightarrow X$	Mass action (irreversible)	0,0177916	
	New Reaction				

K von R1=0,1; alle andere 0,2.



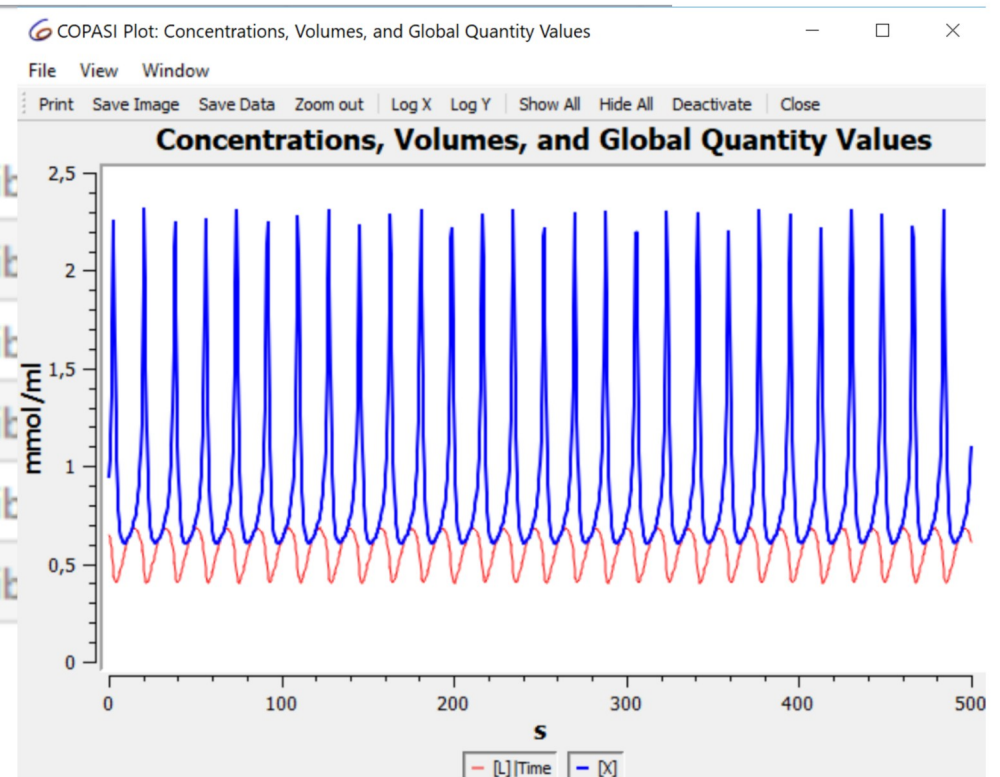
Winkel Alpha:

1. Ausgangskonzentration
2. Koeffizienten der Aufbau- und Zerfall-Gleichungen
3. Frequenz von dem Brusselator



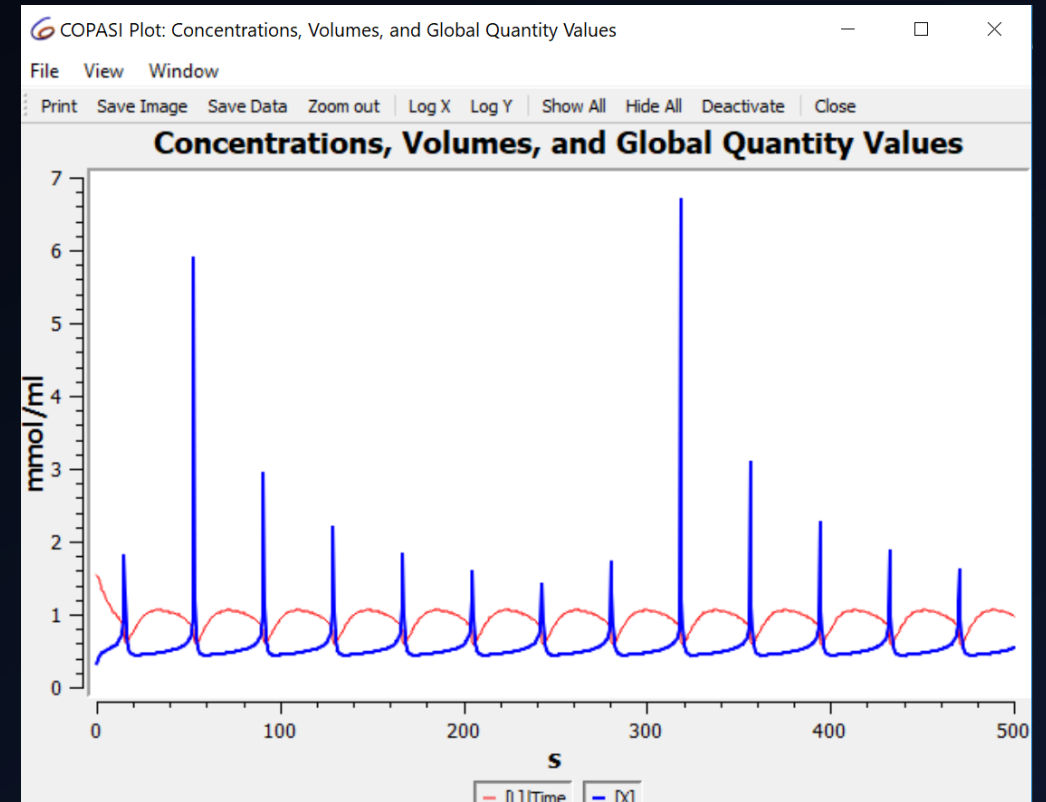
#	Name	Reaction	Rate Law
1	R1	$A \rightarrow 2 * X$	Mass action (irreversib
2	R2	$3 * X + Y \rightarrow 4 * X$	Mass action (irreversib
3	R3	$X + B \rightarrow Y$	Mass action (irreversib
4	R4	$2 * X \rightarrow E$	Mass action (irreversib
5	reaction	$L \rightarrow 2 * L$	Mass action (irreversib
6	reaction_1	$2 * L + X \rightarrow X$	Mass action (irreversib

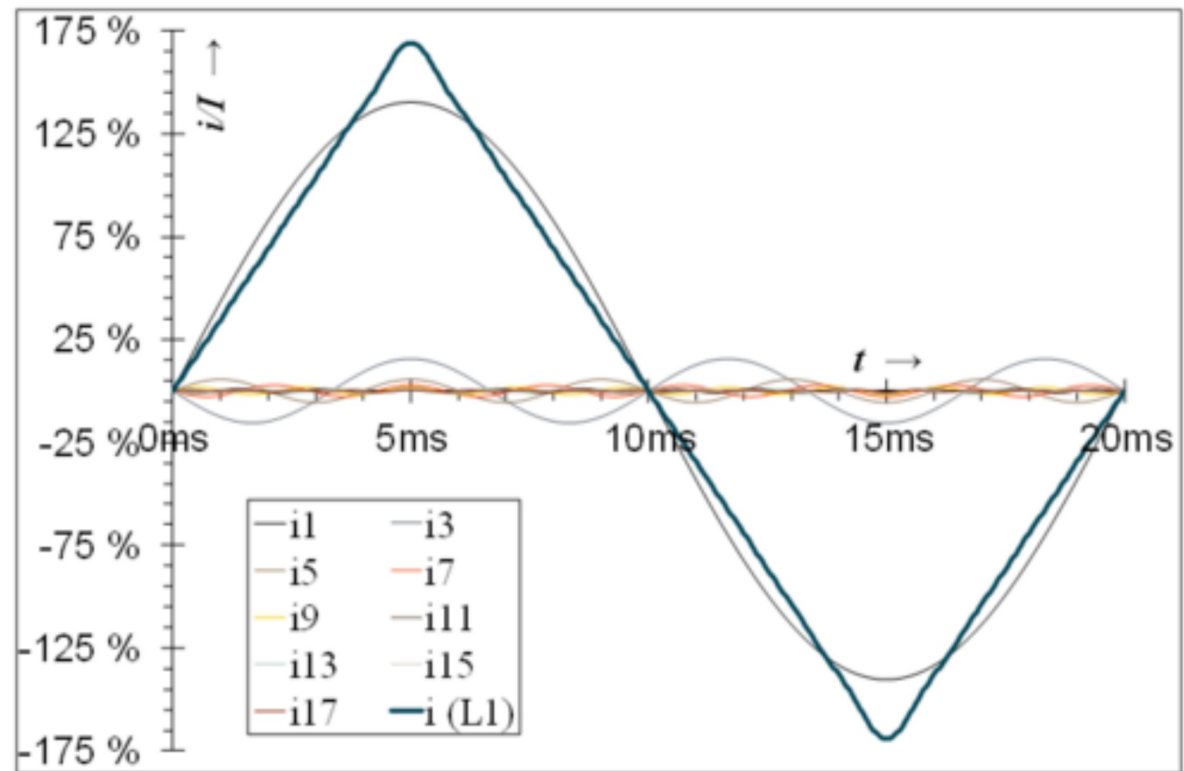
Geschwindigkeit der Zerfallsreaktion $X \rightarrow E$ gemeinsam mit autokatalytischer Reaktion $Y + 2 * X \rightarrow 3 * X$ bestimmt hauptsächlich die **Periodenlänge**



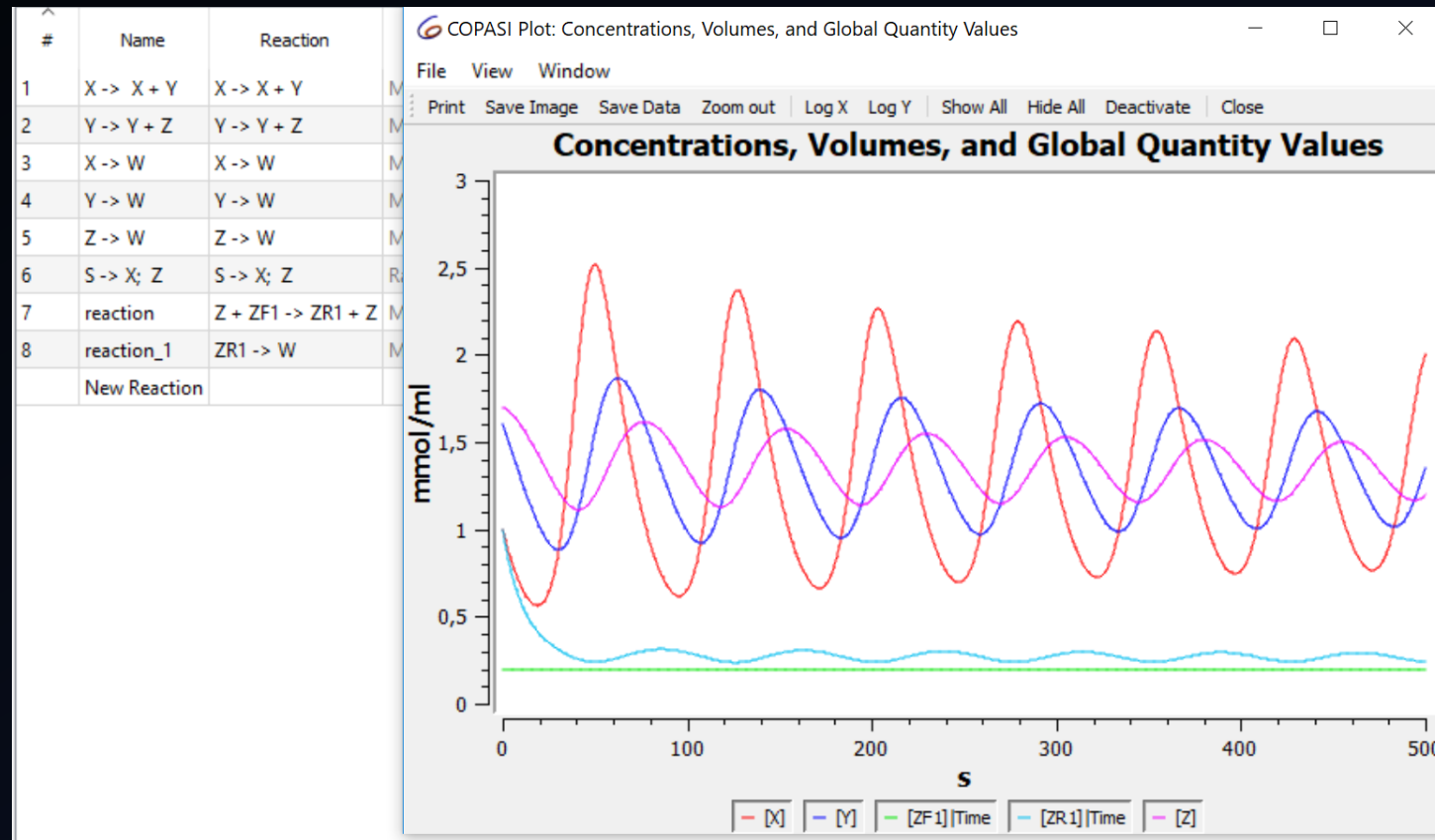
Höhere Frequenz des Brusselators liefert spitze Signale.

#	Name	Reaction	Rate Law	Flux [mmol/s]
1	R1	$A \rightarrow 3 * X$	Mass action (irreversible)	0,1
2	R2	$4 * X + Y \rightarrow 5 * X$	Mass action (irreversible)	0,125815
3	R3	$X + B \rightarrow Y$	Mass action (irreversible)	0,322635
4	R4	$3 * X \rightarrow E$	Mass action (irreversible)	0,0310964
5	reaction	$L \rightarrow 2 * L$	Mass action (irreversible)	0,197176
6	reaction_1	$2 * L + X \rightarrow X$	Mass action (irreversible)	0,104529
	New Reaction			



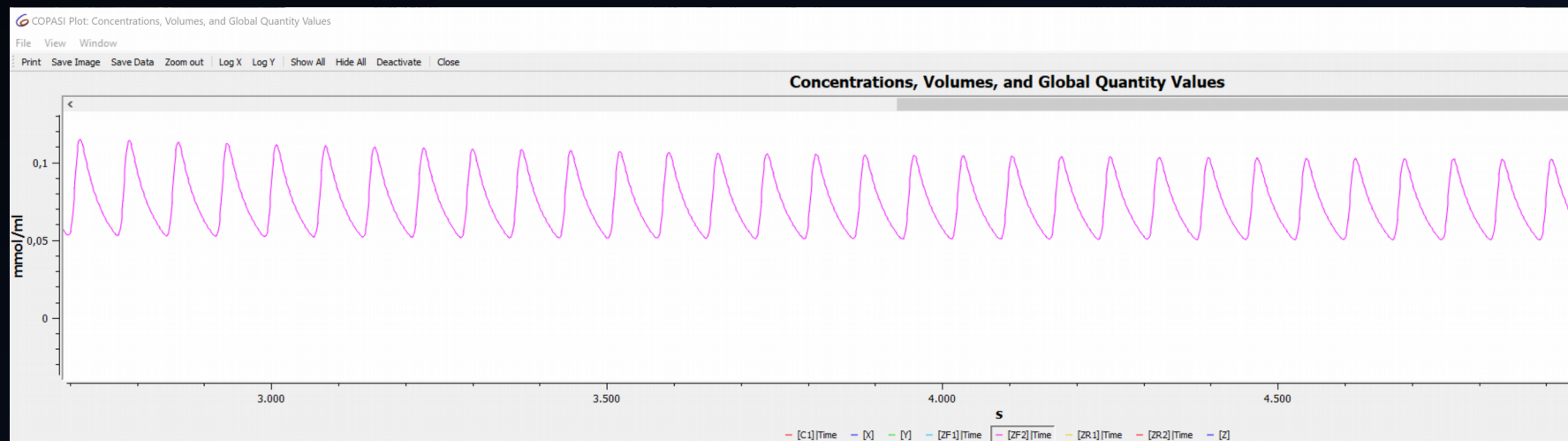


Grundlage für den Aufbau der sinusförmigen Funktionen mit verschiedenen Amplituden: Multiplikation mit dem geraden Signal bestimmter Amplitude



Das erste Ergebnis

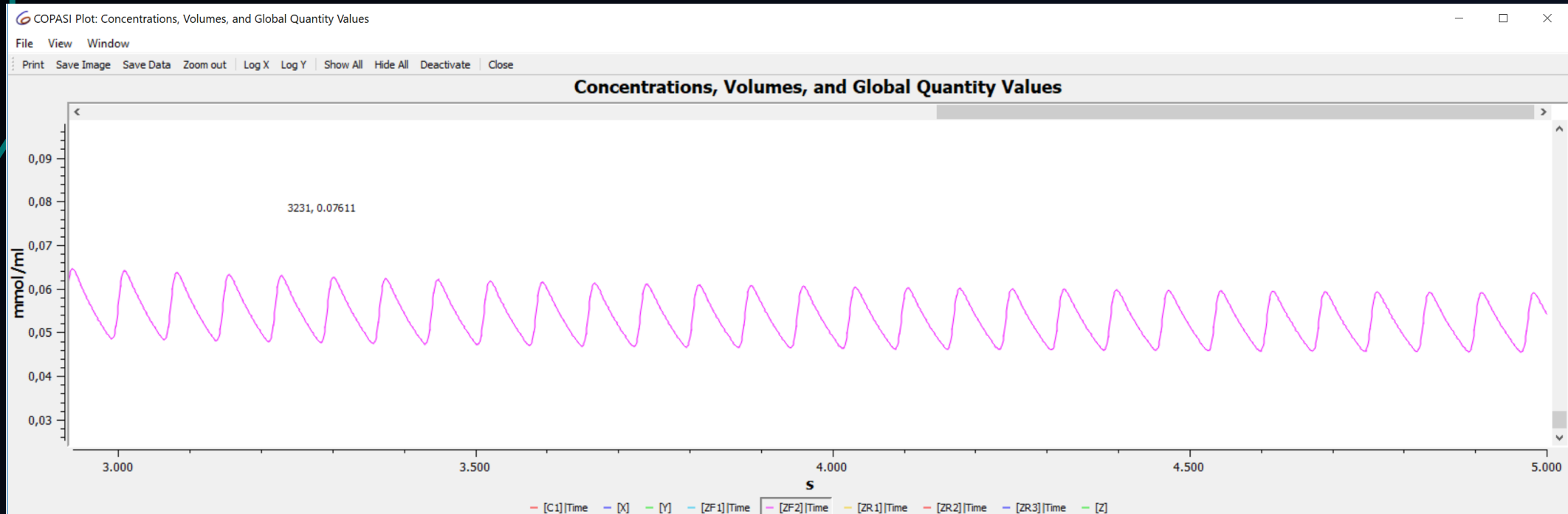
#	Name	Reaction	Rate Law	Flux [mmol/s]
1	X -> X + Y	X -> X + Y	Mass action (irreversible)	0,0544883
2	Y -> Y + Z	Y -> Y + Z	Mass action (irreversible)	0,0701041
3	X -> W	X -> W	Mass action (irreversible)	0,0544883
4	Y -> W	Y -> W	Mass action (irreversible)	0,0701041
5	Z -> W	Z -> W	Mass action (irreversible)	0,0711231
6	S -> X; Z	S -> X; Z	Rate Law for -> X; Z	0,0301893
7	Sinus 1	Z + C2 -> ZR1 + Z	Mass action (irreversible)	0,0284492
8	Sinus 1, Zerfall	ZR1 -> W	Mass action (irreversible)	0,0276549
9	Dreieck, Zerfall	2 * ZF2 -> W	Mass action (irreversible)	0,0010866
10	Dreiecksignal ZF2	20 * X + 4 * ZR1 + 2 * ZR2 -> 2 * ZF2 + 20 * X + 4 * ZR1 + 2 * ZR2	Mass action (irreversible)	5,77817e-07
11	Sinus 2	ZR1 + C1 -> ZR2 + ZR1	Mass action (irreversible)	0,00138275
12	Sinus 2, Zerfall	ZR2 -> W	Mass action (irreversible)	0,0013305
	New Reaction			



Geänderte
Startkonzentrationen
und hinzufügen einer
neuen Sinusfunktion

#	Name	Compartment	Type	Unit	Initial Concentration [Unit]	Concentration [Unit]	Rate [Unit/s]
1	X	compartment	reactions	mmol/ml	1,1	0,994496	-0,0170748
2	Y	compartment	reactions	mmol/ml	1,6	1,32637	-0,0165938
3	Z	compartment	reactions	mmol/ml	1,7	1,40959	-0,00416119
4	W	compartment	reactions	mmol/ml	0	14424,6	0,282632
5	S	compartment	fixed	mmol/ml	1,5	1,5	0
6	ZF1	compartment	fixed	mmol/ml	0,2		
7	ZR1	compartment	reactions	mmol/ml	1		
8	ZF2	compartment	reactions	mmol/ml	1		
9	C1	compartment	fixed	mmol/ml	0,8		
10	ZR2	compartment	reactions	mmol/ml	1		
11	C2	compartment	fixed	mmol/ml	0,05		
12	C3	compartment	fixed	mmol/ml	0,6		
13	ZR3	compartment	reactions	mmol/ml	1		
	New Species	compartment	reactions	mmol/ml	1		

#	Name	Reaction	Rate Law	Flux [mmol/s]
1	X -> X + Y	X -> X + Y	Mass action (irreversible)	0,0497248
2	Y -> Y + Z	Y -> Y + Z	Mass action (irreversible)	0,0663186
3	X -> W	X -> W	Mass action (irreversible)	0,0497248
4	Y -> W	Y -> W	Mass action (irreversible)	0,0663186
5	Z -> W	Z -> W	Mass action (irreversible)	0,0704797
6	S -> X; Z	S -> X; Z	Rate Law for -> X; Z	0,03265
7	Sinus 1	Z + C2 -> ZR1 + Z	Mass action (irreversible)	0,00704797
8	Sinus 1, Zerfall	ZR1 -> W	Mass action (irreversible)	0,00697451
9	Dreieck, Zerfall	2 * ZF2 -> W	Mass action (irreversible)	3,09225e-05
10	Dreiecksignal ZF2	20 * X + 4 * ZR1 + 2 * ZR2 + 5 * ZR3 -> 2 * ZF2 + 20 * X + 4 * ZR1 + 2 * ZR2 + 5 * ZR3	Mass action (irreversible)	5,09273e-09
11	Sinus 2	ZR1 + C1 -> ZR2 + ZR1	Mass action (irreversible)	0,00557961
12	Sinus 2, Zerfall	ZR2 -> W	Mass action (irreversible)	0,0054096
13	Sinus 3	Z + C3 -> Z + ZR3	Mass action (irreversible)	0,0845757
14	Sinus 3, Zerfall	ZR3 -> W	Mass action (irreversible)	0,0836941
	New Reaction			





DANKE FÜR DIE AUFMERKSAMKEIT